

粒子法コード開発フレームワークの開発

Development of Framework for Developing Particle Simulators

岩澤全規

理化学研究所計算科学研究センター

1. 研究目的

コンピュータシミュレーションの手法は大きく粒子法とメッシュ法の2つに大別される。粒子法ではシミュレーション対象となる系を相互作用する粒子の集団として表現し、粒子の時間発展を追うことで系の進化を表現する方法である。粒子法では系の進化に合わせて、粒子が自然に移動するため、大きく変形する様な系や密度コントラストの強い系のシミュレーションに適しており、科学や工学分野で幅広く使われている。しかし、粒子法を大規模並列計算機で効率良く動作するプログラムを作ることは容易ではない。例えば、粒子法によるシミュレーションでは計算負荷を均等にするような動的な領域分割等が必要であり、また粒子間相互作用を効率的に計算するために粒子を木構造で管理する必要がある。そこで我々はユーザーが容易に効率の良い並列粒子コードの開発出来る粒子法用のフレームワーク(FDPS:Framework for Developing Particle Simulators)の開発を行ってきた。本研究課題ではFDPSのさらなる最適化を行うと共にFDPSを用いた実アプリケーションの開発も行う。特に、大規模並列時の性能向上や、相互作用計算以外の部分の計算量を減らす様々な新しいアルゴリズムの開発を行いました、FDPSをC言語で書かれたアプリケーションプログラムから利用できるようする。

2. 研究成果の内容

フレームワークFDPSの開発及びFDPSを用いた様々なアプリケーション開発を行った。具体的には、大規模並列時の性能向上や、相互作用計算以外の部分の計算量を減らす様々な新しいアルゴリズムを実装した。また、使用メモリー量を削減するためにFDPSにメモリープールの実装も行った。さらに、FDPSをCのアプリケーションプログラムから利用できるようにし、C言語で書いたアプリケーションがC++で書かれたものと同等の性能が実現できることを確認した。アプリケーションプログラムとしては、重力N体+SPH法による銀河形成シミュレーションコードの開発を行った。これらの機能やサンプルプログラムを取り入れたFDPS v5.0を11月にリリースした。

3. 今後の展望

FDPS自体の開発及びFDPSを用いた様々なアプリケーション開発を行い大規模並列計算機で効率よく動作することを確認した。さらに、通信部分の最適化やメモリー消費

量の削減、C言語へのインターフェースも開発した。これにより、ユーザーの拡大が期待できる。

今後は、GPUやポスト「京」等の様々なアーキテクチャのための最適化を行っていき、様々な大規模並列計算機で効率よく動作するようにしていきたい。

4. 成果発表

- (1) 学術論文 Namekata et al, PASJ, 2018, 70, 70.
- (2) 学会発表 第167回 HPC ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会、沖縄、12月17日-18日
- (3) その他

| 使用計算機 | 使用計算機 に○ | 配分リソース※ | |
|-----------------------------|-------------|---------|------|
| | | 当初配分 | 追加配分 |
| COMA | | | |
| Oakforest-PACS | ○ | 81608 | 0 |
| ※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 | | | |